

ФЛУКТУАЦІЇ СКЛАДУ У ТВЕРДИХ РОЗЧИНАХ $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$, ТА ЇХ ВПЛИВ НА РУХЛИВІСТЬ НОСІЇВ СТРУМУ

У роботі проведено дослідження флуктуацій складу в твердих розчинах кремній-германій з концентрацією неосновної компоненти $< 1\%$ та їхній вплив на рухливість носіїв струму. Показано, що ефективні значення геометричного розміру неоднорідного розподілу неосновної компоненти лежить у межах від 20 до 300 Å; температурні залежності рухливості електронів добре описуються у рамках дифузійного наближення у температурному інтервалі 77–200 К.

У слабоконцентрованих твердих розчинах кремній-германій та германій-кремній атоми неосновної компоненти впливають на явища перенесення заряду як нейтральні елементарні розсіюючі центри, а також як нейтральні чи заряджені комплекси, що виникають при взаємодії з атомами домішок. У разі збільшення концентрації неосновної компоненти твердого розчину на процеси перенесення заряду все більше впливатиме невпорядкованість ґратки. Очевидно, що рівномірний розподіл неосновної компоненти у монокристалі, особливо при збільшенні її концентрації, ускладнюється у результаті сильної сегрегації під час кристалізації розчину. Реальна структура монокристалів сплавів визначається термодинамікою процесу кристалізації, який включає у себе взаємодію багатьох частинок. Двохатомні комплекси – германій-германій, кремній-кремній утворюються у розплаві за температури, близької до температури кристалізації. На передкристалічному етапі двохатомні комплекси можуть об'єднуватись у кластери [1].

Існування неоднорідних областей (НО), зумовлених флуктуацією кремнію у твердому розчині $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$, встановлено на основі експериментальних досліджень стрибкової провідності [2], магнітоопору [3] та ін. Хоча й припущення про наявність кластерів кремнію у матриці германію у сплаві достатньо аргументовано, проте прямі методи їх реєстрації ускладнені. Наприклад, трансмісійна мікроскопія не дає відомостей про ступінь досконалості системи $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$, оскільки немає можливості помітити локальні зміни параметра ґратки за мікродифракційними картинами через малі кути дифракції та малість самих величин виміру. Якщо уявити структуру сплавів як маледеформовані куби з розмірами, які змінюються залежно від зміни складу, то відносна зміна параметра ґратки германію при одному

відсотковій вмісту домішки кремнію становитиме лише $4,6 \cdot 10^{-4}$. Подібні дефекти можна виявити методами рентгенівської топографії у випадку, коли на преципітатах кремнію утворюються скупчення домішок дефектів. Власне, такі неоднорідні області з діаметром кілька мікрометрів було виявлено при дослідженні сплавів $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ у роботі [4].

Що ж стосується кремнієподібних сплавів, то, як показують результати досліджень [5], легкоплавка компонента германію збирається й виділяється у вигляді окремої фази у зоні найвищої температури, що є причиною існування неоднорідних областей у даних кристалах. Окрім того, як показано в роботах [6, 7], для атомів германію у твердому розчині $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ існує критична концентрація $N_{\text{Ge}}^{\text{кр}} = 2 \cdot 10^{20} \text{ см}^{-3}$, за якої різко розпочинаються процеси кластеризації германію в матриці кремнію.

Масштаб флуктуацій складу (геометричний розмір і кількість атомів ізовалентної домішки у кластері) можна оцінити з експериментальних та теоретичних досліджень. Так, у рамках наближення ефективної маси [2, 8] зміна енергії активації стрибкової провідності залежно від складу сплаву відповідає вмісту в НО від 30 до 150 атомів кремнію в матриці германію. Аналіз температурних залежностей холлівської рухливості у припущенні адитивності механізмів розсіяння [2] показує, що кластери містять від 50 до 100 атомів ізовалентної домішки кремнію у твердому розчині $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$, а у рамках дифузійного наближення [9] для концентрацій неосновної компоненти $10^{-4} \leq x \leq 4 \cdot 10^{-2}$. Це дає змогу оцінити зміну геометричних розмірів неоднорідних областей, яка становить 50+700 Å. Що ж стосується твердих розчинів $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$, то, оскільки кремній та германій утворюють ряд неперервних твердих розчинів, можна припустити, що і у кристалах

кремній-германій домішкові атоми Ge також утворюють скупчення різних розмірів.

Зрозуміло, що наявність флуктуацій складу неосновної компоненти у твердих розчинах суттєво відобразиться на значеннях рухливості носіїв струму. А тому питання про механізми розсіювання, які визначають рухливість носіїв у твердих розчинах $\text{Ge}_{1-x}\text{Si}_x$ та $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$, які розглядалися у низці робіт [1, 2, 9], продовжують залишатись актуальними, оскільки однозначної відповіді на них немає. Так, у працях [9, 10] у дифузійному наближенні описано поведінку рухливості носіїв струму в твердому розчині $\text{Ge}_{1-x}\text{Si}_x$ у достатньо широкому температурному інтервалі. Крім того, було зроблено припущення, що причини зменшення рухливості у кристалах германій-кремній та кремній-германій, які пов'язані з неоднорідністю розподілу неосновної компоненти у разі збільшення її концентрації, одні й ті самі. Як показують наші дослідження [11], поведінка рухливості у твердих розчинах $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ із збільшенням концентрації неосновної компоненти якісно подібна до рухливості у кристалах $\text{Ge}_{1-x}\text{Si}_x$. Тому цілком можливо, що механізми, як і лімітування рухливості носіїв струму за невеликих концентрацій неосновної компоненти у двох типах розчинів, подібні.

Ці припущення щодо існування флуктуацій у твердих розчинах $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ дають підстави застосувати методику дослідження кристалів $\text{Ge}_{1-x}\text{Si}_x$ на наявність кластерів та їх розміри, запропоновану в роботі [2] для твердих розчинів $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$. Для холлівської рухливості при розсіянні на флуктуаціях складу згідно з [2] маємо:

$$\mu_H = \frac{\pi^{3/2}}{2\sqrt{2}} \frac{e\hbar^4 N}{(m^*)^{5/2} \alpha^2 K (k_0 T)^{1/2}}, \quad (1)$$

де m^* – ефективна маса електрона, $\alpha = \left(\frac{\partial E_c}{\partial x} \right)_{x=\bar{x}}$ – описує зміну дна зони провідності залежно від складу твердого розчину, K – кількість атомів у кластері, N – концентрація вузлів ґратки атомів кремнію.

Як видно зі співвідношення (1), розсіювання на флуктуаціях складу проявляє температурну залежність $\mu_H \sim T^{-0.5}$. Розрахунки, проведені нами у роботі [12], показують, що у твердих розчинах $\text{Si}\langle\text{Ge}\rangle$ атоми ізовалентної домішки германію утворюють групи у кількості від 20 до 70 атомів залежно від рівня легування.

Довівши існування флуктуацій складу неосновної компоненти, визначимо геометричні розміри таких флуктуацій та проаналізуємо загальну рухливість носіїв струму з погляду існування неоднорідних областей (НО).

Германію в матриці кремнію зумовить появу внутрішніх електричних полів з просторовим масштабом $L \geq l_D$ (l_D – дебайвська довжина екранування), який зазвичай перевищує довжину вільного пробігу носіїв струму при розсіянні на фонах $\sim 100 \text{ \AA}$ [13]). У такому разі для врахування даних особливостей слід застосувати дифузійне наближення [14], в якому для холлівської рухливості згідно з [10] отримано співвідношення:

$$\mu_H = \mu_H^0 \frac{3 \cdot (2 - \epsilon)}{5 - 2 \cdot \epsilon}, \quad (2)$$

де μ_H^0 холлівська рухливість в однорідному напівпровіднику,

$$\epsilon = \left\langle e^{-\frac{2e\Phi}{kT}} \right\rangle / \left\langle e^{-\frac{e\Phi}{kT}} \right\rangle^2, \quad -$$

Φ – потенціал, зумовлений усіма N неоднорідними областями, $\langle \dots \rangle$ – усереднення за усіма можливими розміщеннями НО.

Вважаючи розподіл НО рівномірним та беручи до уваги той факт, що наявність неоднорідних областей приводить до виникнення потенціалу E , який визначається різницею рівнів Фермі у матриці кремнію та кластері германію, маємо:

$$\ln \left(1 + \frac{3 \cdot \Delta\mu}{1 + 2 \cdot \Delta\mu} \right) = \frac{N_{\text{Ge}}}{N_0} \cdot \left(\frac{l_d}{r} \right) \cdot \left[\frac{3}{2} + \frac{3 \cdot \Phi_0 \cdot r}{l_d} - \frac{3}{2} \cdot \left(1 + \frac{3 \cdot \Phi_0 \cdot r}{l_d} \right)^{2/3} \right], \quad (3)$$

де $\Delta\mu = (\mu_H^0 - \mu_H) / \mu_H^0$, N_{Ge} – концентрація ізовалентної домішки, N_0 – концентрація атомів Ge у кристалі германію, r – геометричний розмір НО, $\Phi_0 = E/kT$.

На рис. 1 подано експериментальні температурні залежності $\Delta\mu$ для $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ та теоретичні, розраховані за формулою (3). Єдиним підгоночним параметром у розрахунку $\Delta\mu$ був геометрич-

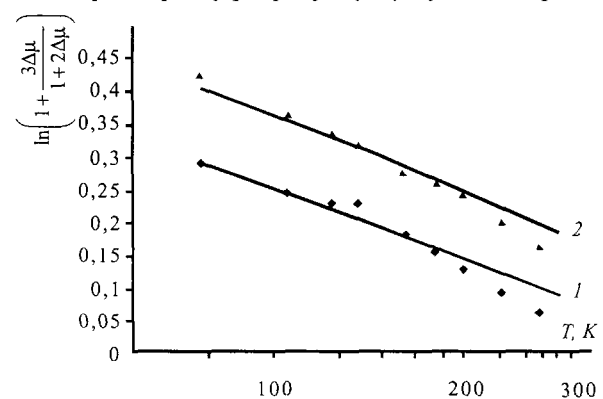


Рис. 1. Теоретичні (суцільні) та експериментальні температурні залежності $\Delta\mu$ твердих розчинів $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ за різних концентрацій Ge:
1 – $N_{\text{Ge}} = 4 \cdot 10^{19} \text{ cm}^{-3}$, 2 – $N_{\text{Ge}} = 2 \cdot 10^{20} \text{ cm}^{-3}$

ний розмір неоднорідних областей. Для даного інтервалу концентрацій $4 \cdot 10^{-4} \leq x \leq 4 \cdot 10^{-3}$ ефективні значення геометричного розміру неоднорідностей лежать у межах $20 \leq r \leq 300 \text{ \AA}$. Як видно з рис. 1, використане наближення дає змогу описати температурну залежність рухливості в інтер-

валі 70÷200 К. Цей результат засвідчує правильність припущень щодо спільності причин зниження рухливості у твердих розчинах зі збільшенням концентрації неосновної компоненти як в кристалах кремній-германій, так і у кристалах германій-кремній.

1. Шаховцова С. И., Шаховцов К. В., Шпинар Л. И., Ясковец И. И. Масштаб флуктуаций состава в сплавах $\text{Ge}_{1-x}\text{Si}_x$ // ФТП.– 1993.– Т. 27.– № 6.– С. 1035–1039.
2. Шлимак И. С., Эфрос А. А., Янчев И. Я. Исследование роли флуктуаций состава в твердых растворах Ge-Si // ФТП.– 1977.– Т. 11.– № 2.– С. 257–261.
3. S. I. Shahovtsova, V. I. Shahovtsov, I. N. Belokurova The mobility of carriers and the magnetoresistance of Ge-Si alloys // Sol. St. Commun.– 1982.– Vol. 41.– № 4.– P. 1169–1174.
4. Плавление, кристаллизация и фазообразование в невосомости: Эксперимент «Универсальная печь» по программе Союз-Аполлон.– М.: Наука, 1979.– 255 с.
5. Шамба Н. А., Швангеридзе Р. Р., Лалыкин С. П. К вопросу разделения компонент сплава Si-Ge в процессе зонной плавки температурным градиентом: Тезисы докладов «VI координационного совещания по исследованию и применению сплавов кремний-германий».– Тбилиси: «Ленинское знамя», 1986.– С. 4.
6. Соловьева Е. В., Мильвидский М. Г. Особенности дефектообразования в полупроводниках при изовалентном легировании // ФТП.– 1983.– Т. 17.– № 11.– С. 2022–2024.
7. Мильвидский М. Г., Рытова Н. С., Соловьева Е. В. Влияние упругих деформаций, создаваемых примесью, на концентрацию и поведение собственных точечных дефектов в полупроводниках // Проблемы кристаллографии.– М.: Мир, 1987.– С. 215–232.
8. Гельмонт Б. А., Гаджиев А. Р., Шкловский Б. И., Шлимак И. С., Эфрос А. Л. Прыжковая проводимость твердых растворов германия с кремнием // ФТП.– 1974.– Т. 8.– № 12.– С. 2377–2384.
9. Шаховцов В. И., Шаховцова С. И., Шварц М. М., Шпинар Л. И., Ясковец И. И. Подвижность носителей тока в твердых растворах $\text{Ge}_{1-x}\text{Si}_x$ // ФТП.– 1989.– Т. 23.– № 1.– С. 48–51.
10. Шпинар Л. И., Ясковец И. И. К теории проводимости и эффекта Холла в неоднородных полупроводниках // ФТТ.– 1984.– Т. 26.– № 6.– С. 1725–1730.
11. A. Semenyuk, A. Korovytsky Study of electrophysical parameters and tensor effects in n-type Si<Ge> crystals: Functional materials.– 2001.– Vol. 8.– № 3.– P. 493–497.
12. Семенюк А., Коровицкий А. Влияние изовалентной домішки германію на розсіювання електронів у кремнії // Фізичний вісник НТШ.– 2001.– Т. 4.– С. 124–128.
13. Зи С. Физика полупроводниковых приборов: В 2-х т.: Пер. с англ.– М.: Мир.– 1984.– Т. 2.– 455 с.
14. Пекар С. И. Теория подвижности эффекта Холла и магнетосопротивления в полупроводниках с заряженными дефектами // ФТТ.– 1966.– Т. 8.– Вып. 4.– С. 1115–1122.

A. Korovytsky, N. Hvischun, R. Semenchenko

THE COMPOSITION FLUCTUATIONS IN THE SOLID SOLUTIONS $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ AND THEIR INFLUENCE ON MOBILITY OF A CURRENT CARRIERS

A research of composition fluctuations in the solid solutions is conducted in work silicon-germanium with concentration of unbasic components < 1% and their influence on mobility of current earners. It is shown that effective values of geometrical size of the heterogeneous distributing of unbasic components are in interval from 20 about 300 Å; temperature dependence of mobility of electrons are well described within the framework of the diffusive approaching in the temperature interval 77-200 K.